Le code XDQ

Mode d'emploi

Jean-François Daïan

Ex Maître de conférences
à l'Université Joseph Fourier
Chercheur bénévole au LTHE

Novembre 2007

Avant propos

Le modèle XDQ est un outil destiné à aider à l'interprétation de la caractérisation des matériaux poreux par porométrie au mercure. Il propose à partir de cette caractérisation plusieurs reconstitutions hypothétiques de la structure poreuse et pour chacune, une évaluation de plusieurs coefficients de transport du matériau.

Pour bien utiliser cet outil, il faut être averti des mécanismes assez complexes de l'injection du mercure dans un poreux et des hypothèses fortes concernant la structure poreuse sur lesquelles repose la méthode XDQ de reconstitution. Le document intitulé *« Porométrie au mercure ; le modèle XDQ »* (90 pages) apporte un ensemble assez complet d'indications nécessaires pour interpréter la porométrie au mercure au moyen de ce modèle.

Le présent *Mode d'emploi*, en partie extrait de ce document, est suffisant pour mettre en oeuvre le code, et comprendre l'essentiel des résultats. Cet abrégé peut suffire à l'utilisateur bien averti de la théorie des poreux et du transport en poreux. Pour les utilisateurs moins initiés, le *Mode d'emploi* renvoie au document complet pour plus de détails. Les N° de paragraphes, figures, tableaux, fiches du ***Catalogue*** *de matériaux poreux* indiqués en ***italique gras*** se réfèrent à ce document.

1. LA POROMETRIE AU MERCURE ET LE MODELE XDQ 4

1.1 CARACTERISTIQUES D'INJECTION ET D'EXTRACTION, DISTRIBUTION DES TAILLES DE PORES 4

1.2 LA RECONSTITUTION XDQ 5

1.3 TROIS PARAMETRES D'AJUSTEMENT 6

1.3.1 Nombre de classes et troncature 6
1.3.2 Effets de taille des échantillons et de l'état de surface. Indice de rugosité (IR) 6
1.3.3 L'indice de compacité du réseau représentatif (ICR) 6

2. MISE EN OEUVRE DU CODE 7

2.1 EXECUTABLES ET FICHIERS ANNEXES 7

2.2 LE FICHIER DE DONNEES 7

2.3 EXECUTION 8

3 LES RESULTATS 11

3.1 LE FICHIER DES RESULTATS RESUMES 11

3.2 RESULTATS DETAILLES : LES RECONSTITUTIONS 12

3.2.1 Le fichier 12
3.2.2 Distribution des tailles de pores, extraction simulée 13

3.3 ESTIMATION XDQ DES COEFFICIENTS DE TRANSPORT DIPHASIQUES 14

3.3.1 Le tableau 14
3.3.2 Les saturations résiduelles 16
3.3.3 Conductivité et perméabilité. 16
3.3.4 Transport couplé d'humidité 17
3.3.5 La perméabilité aux gaz 17

4 CHOISIR ENTRE LES RECONSTITUTIONS 18

4.1 L'EMBARRAS DU CHOIX 18

4.2 LE NIVEAU DE TRONCATURE 19

4.3 L'INDICE DE RUGOSITE (*IR*) 19

4.4 L'INDICE DE COMPACITE DU RESEAU (*ICR*) 20

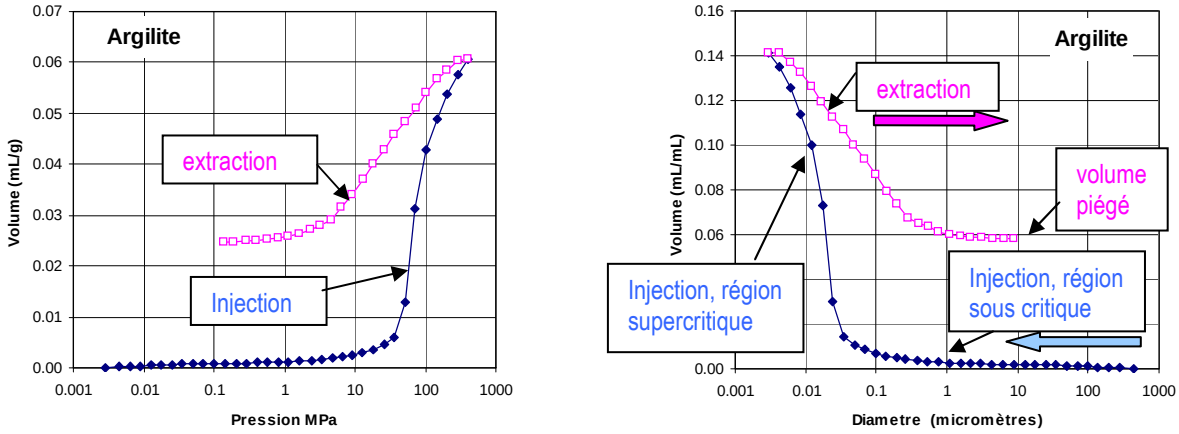
4.5 LES INDICATEURS INDIRECTS 20

4.6 XDQ NE PEUT PAS TOUT FAIRE 21

1. LA POROMETRIE AU MERCURE ET LE MODELE XDQ

1.1 CARACTERISTIQUES D'INJECTION ET D'EXTRACTION, DISTRIBUTION DES TAILLES DE PORES

Le résultat brut d'un essai de porométrie au mercure est la ***caractéristique d'injection***, qui donne le volume pénétré dans l'échantillon en fonction de la pression du mercure (Fig. 1-a). Les logiciels associés aux porosimètres à mercure donnent généralement le volume de mercure par unité de masse de l'échantillon (mL/g) et calculent par ailleurs la ***porosité*** ε, rapport du volume total des pores au volume extérieur de l'échantillon. La caractéristique d'injection peut alors être convertie en mL/mL par règle de trois.



a Caractéristiques brutes *b Caractéristiques traitées*

Fig. 1 Caractéristiques d'injection et d'extraction brutes. Caractéristiques traitées : volume en mL/mL, pression convertie en diamètre de pore

Cette information est facultativement complétée par la ***caractéristique d'extraction*** du mercure qui est incomplète, s'interrompant à la pression atmosphérique. Un volume de mercure plus ou moins important reste ***piégé*** dans l'échantillon en fin d'extraction.

Le diamètre minimal des pores pénétrables par le mercure est lié à la pression P par la loi de Laplace (***§ 1.2***) :

$$D = -\frac{4\gamma\cos\theta}{P} \qquad (1)$$

γ et θ sont la tension superficielle et l'angle de contact du mercure. Les caractéristiques peuvent donc être représentées en portant en abscisse le diamètre minimal des pores accessibles et en ordonnées le volume en mL/mL (fig. 1-b). Ce sont ces *caractéristiques traitées* qui seront utilisées par XDQ.

Ni la caractéristique d'injection, ni la caractéristique d'extraction ne s'identifient cependant à la ***distribution cumulative des tailles de pores selon le volume***, en raison des phénomènes d'accessibilité et de piégeage du mercure qui affectent l'injection et l'extraction (***§ 1.3***). La distribution se situe entre les caractéristiques d'injection et d'extraction. Le but du modèle XDQ est précisément de réaliser une ***reconstitution*** de la distribution.

Le sens de l'injection du mercure est celui des diamètres de pores décroissants (Fig. 1-b). Les caractéristiques d'*injection* (traitées) et les *distributions* cumulatives se lisent donc *de droite à gauche*. Les caractéristiques d'*extraction* se lisent de gauche à droite. D'où le vocabulaire : « Injection au delà du diamètre 1 µm » désigne la partie de la caractéristique d'injection qui est à gauche de l'abscisse 1 µm ; « Queue de distribution » désigne la partie gauche de la courbe de distribution. « Fin d'extraction » désigne la partie droite de la caractéristique d'extraction. Il faut s'y faire !

La partie à forte pente de la courbe d'injection (qui n'est pas toujours aussi nette que dans l'exemple présenté Fig. 1) est le voisinage du ***seuil de percolation***, localisé précisément au ***diamètre critique***. Ce seuil marque la limite entre deux phases de l'injection (***§ 1.3.2***). La phase ***sous-critique*** de l'injection est caractérisée par une ***invasion superficielle*** de l'échantillon par le mercure. Au delà du diamètre critique commence la seconde phase qui est celle à l'***invasion à coeur***. La reconstitution XDQ localise le diamètre critique.

1.2 LA RECONSTITUTION XDQ

Pour le procédé de reconstitution XDQ (***§ 2.1***), le poreux est défini par une distribution volumique des diamètres de pores ***discrète***. Elle se compose d'un nombre n de ***classes de pores*** indicées k ($1 \le k \le n$), chacune occupant le volume poreux v_k par unité de volume du matériau. Les diamètres de pores constituent une suite géométrique décroissante de raison 2 :

$$d_k = \frac{d_1}{2^{k-1}} \tag{2}$$

L'injection du mercure telle qu'elle est « simulée » par XDQ connaissant la distribution, est également discrète. Le pas de pression qui donne accès à la classe de pores k est défini, en termes de diamètres accessibles, par l'intervalle :

$$\left[D_{k-1} = d_k \sqrt{2} \ , \ D_k = \frac{d_k}{\sqrt{2}} \right] \tag{3}$$

XDQ calcule la distribution volumique des diamètres de pores $v_k(d_k)$ de telle façon que les points de la caractéristique d'injection simulée $(D_k, V_{\text{inj } k})$ se placent exactement sur la caractéristique expérimentale.

La reconstitution obtenue permet aussi de simuler l'extraction du mercure. La caractéristique d'extraction simulée ne coïncide pas avec la caractéristique expérimentale, contrairement à la caractéristique d'injection. L'une des raisons en est que la simulation ne prend pas en compte l'effet de retard à la cavitation du mercure qui affecte en général l'extraction.

La reconstitution obtenue est ensuite utilisée pour évaluer plusieurs propriétés de transport de l'espace poreux.

1.3 TROIS PARAMETRES D'AJUSTEMENT

1.3.1 Nombre de classes et troncature

Pour déterminer les classes de pores, leur nombre *n* et l'échelle des diamètres correspondante (***§ 2.2.1***), le dernier niveau de pression à l'injection est associé au diamètre D_n. La courbe d'injection discrétisée $(D_k, V_{\text{inj } k})$ est déterminée à partir de là par interpolation entre les points de la caractéristique expérimentale.

Le volume injecté au cours des premiers pas de pression correspond généralement au remplissage de la rugosité superficielle de l'échantillon, qui ne fait pas partie de la porosité. Cela se manifeste plus ou moins nettement par une région de la caractéristique à concavité dirigée vers le bas (plus visible sur l'exemple Fig.2 ci après que sur la Fig. 1).

Il faut dès lors réaliser une ***troncature*** adéquate de la caractéristique. L'utilisateur du code choisit un ou plusieurs niveaux de troncature, c'est le premier paramètre d'ajustement du modèle. Pour chaque niveau de troncature envisagé, le code calcule le nombre de classes qui en découle et corrige la porosité et toute la caractéristique d'injection.

1.3.2 Effets de taille des échantillons et de l'état de surface. Indice de rugosité (IR)

Le rapport surface/volume de l'échantillon a une influence déterminante sur la partie sous-critique de la caractéristique d'injection au cours de laquelle la pénétration du mercure reste superficielle (***§ 1.5.2 et 2.2.2***). Pour reconstituer la distribution des tailles de pores, XDQ doit exploiter la totalité de la caractéristique d'injection expérimentale, y compris sa partie sous critique, même lorsqu'elle est mal définie.

Pour le procédé XDQ, l' « échantillon » est un cube qui a le même rapport surface/volume que l'échantillon réel. Or ce rapport dépend principalement de deux facteurs : d'une part, la taille de l'échantillon ou celle des grains qui le constituent, d'autre part, la rugosité de sa surface. La taille est connue et sera indiquée par l'utilisateur lors de l'exécution du code. La rugosité, difficile à apprécier, constitue le deuxième paramètre d'ajustement. La reconstitution est réalisée pour 6 valeurs de ***l'indice de rugosité (IR)*** voisines de 1, 2, 4, ..., 32.

1.3.3 L'indice de compacité du réseau représentatif (ICR)

Le procédé XDQ réalise la reconstitution en répartissant le volume poreux sur les liens d'un réseau qui peut être plus ou moins complètement occupé par les pores. Ce troisième paramètre d'ajustement du modèle dénommé ***indice de compacité du réseau (ICR)*** est au moins égal à la porosité ε du matériau, et au plus égal à 1.

Ce paramètre est censé représenter différentes particularités morphologiques de l'espace poreux (***§ 1.4*** et ***§ 2.2.3***), notamment tenir compte du fait que la forme cylindrique des pores adoptée par le modèle n'est pas nécessairement adéquate pour décrire la microgéométrie de l'espace poreux. Ces facteurs morphologiques échappent à toute quantification. XDQ effectue donc la reconstitution pour 6 valeurs de l'indice de compacité comprises entre la porosité et 0.99.

Les matériaux tels que les mortiers comportent un composant solide non poreux, les granulats, qui occupe une fraction volumique de la matière. Seul le liant qui occupe la fraction complémentaire est poreux. La porosité intrinsèque du liant est par conséquent supérieure à la

porosité globale du mortier, telle qu'elle est indiquée par la courbe d'injection. Dans ce cas, XDQ adoptera comme minimum de l'indice de compacité du réseau la porosité intrinsèque du liant, calculée à partir de la ***fraction de matière non poreuse*** indiquée à l'exécution par l'utilisateur.

XDQ offre donc potentiellement, compte tenu de l'indice de rugosité (IR) et de l'indice de compacité du réseau (ICR), 6×6=36 reconstitutions hypothétiques, à multiplier encore par le nombre de troncatures demandées par l'utilisateur, le tout pour le prix d'une seule caractéristique d'injection expérimentale. L'embarras du choix nous menace...

2. MISE EN OEUVRE DU CODE

2.1 EXECUTABLES ET FICHIERS ANNEXES

Le code XDQ comporte deux versions qui diffèrent par les coefficients de transport évalués. La version courante est réalisée par l'exécutable ***xdqctr .exe***. *ctr* signifie *coefficients de transport*. Cette version calcule principalement la conductivité relative de l'espace poreux, la perméabilité au liquide et à l'air sous la pression atmosphérique normale, et le coefficient de diffusion de la vapeur d'eau. La seconde version, ***xdqkg .exe***, s'intéresse plus particulièrement aux variations de la perméabilité aux gaz (notée k_g, d'où le nom de l'exécutable) avec la pression.

L'exécution utilise la bibliothèque ***cygwin1.dll*** téléchargeable et à placer dans le répertoire ***WINDOWS/system32***. L'exécutable doit être placé dans un ***répertoire XDQ*** dédié au calcul, ainsi que les fichiers à lire par le code. Les cinq fichiers texte téléchargeables ***fiy2***, ***fiy3***, ..., ***fiy6*** contiennent les fonctions d'invasion de la Théorie de la percolation nécessaires à la procédure de reconstitution (voir ***§ 6.1.4***).

2.2 LE FICHIER DE DONNEES

Ce fichier texte est à créer par l'utilisateur et à placer dans le répertoire XDQ avant exécution. Il contient la caractéristique d'injection (extraction exclue). Il se présente en deux colonnes séparées par un nombre quelconque d'espaces. La colonne gauche contient les diamètres de pores en microns correspondant aux niveaux de pression de l'injection, dans l'ordre décroissant. La colonne droite contient les volumes de mercure injectés correspondants, en mL par mL de volume extérieur de l'échantillon. Le premier de ces volumes est nécessairement 0, le dernier est la porosité brute indiquée par le porosimètre. Les volumes injectés doivent naturellement être croissants. Il arrive, notamment dans la partie sous-critique de la caractéristique, que, par manque de précision l'appareil donne pour certains pas de pression des accroissements légèrement négatifs du volume. Ces anomalies doivent être éliminées par suppression des points de mesure anormaux, opération sans conséquence majeure, car le logiciel reconstruit une caractéristique par interpolation.

```
435.9125   0.0
280.656   0.006193466
196.0393   0.009947082
137.6706   0.012011571
99.2543   0.012949975
70.3458   0.013888379
49.0418   0.014263741
35.1482   0.014826783

(...)

0.0487   0.327127631
0.0345   0.330693566
0.0244   0.335385586
0.0172   0.340265287
0.0122   0.346834115
0.0086   0.353590623
0.0061   0.362036259
0.0043   0.368042045
0.003   0.3763
```

Ci contre à titre d'exemple, voici le fichier baptisé *hgtc* (comme mercure et Terre cuite) qui correspond à la caractéristique d'injection (Fig. 2 ci après) de la « Terre cuite » présentée dans la ***Fiche N° 1 du Catalogue***. Figure 3 ci après, on peut voir quelques unes des billes de terre cuite qui constituaient l'échantillon traité par le porosimètre.

2.3 EXECUTION

Voici ce qui apparaît à la fenêtre d'exécution. Les réponses de l'utilisateur sont **en rouge**.

```
************************************************
***                X D Q C T R                 ***
***  INTERPRETATION D'UNE INJECTION DE MERCURE  ***
*** ET ESTIMATION DES COEFFICIENTS DE TRANSPORT ***
************************************************


entrer le nom du fichier des volumes d'intrusion
hgtc
Entrer le nom des deux fichiers résultats
Noms suggérés: hgtc-ctr    hgtc-ctr+
hgtc+ hgtc++
```

Les résultats du calcul seront placés dans des fichiers dont le nom est à choisir par l'utilisateur. Les deux noms doivent être écrits sur la même ligne séparés par des espaces. Attention : si vous donnez un nom de fichier déjà existant dans le répertoire XDQ, créé par exemple lors d'une exécution précédente du code, ce fichier sera écrasé.

Le premier fichier contiendra la reproduction quasi intégrale de ce qui s'affiche à la fenêtre durant l'exécution, notamment les choix opérés par l'utilisateur. Le suffixe proposé **-ctr** (ou **-kg**) rappelle la version du code utilisée. Le second fichier (**-ctr+** ou **-kg+)** contiendra le détail des résultats. Ici, l'utilisateur n'a pas suivi les conseils de XDQ pour le nom des fichiers de résultats. XDQ n'est pas chien, aucune punition n'est à craindre pour cet acte d'indiscipline.

```
  D 435.9125  V 0.0000
  D 280.6560  V 0.0062
  D 196.0393  V 0.0099
  D 137.6706  V 0.0120
  D  99.2543  V 0.0129
  D  70.3458  V 0.0139
  D  49.0418  V 0.0143
  D  35.1482  V 0.0148

      ( ..... )

  D   0.0487  V 0.3271
  D   0.0345  V 0.3307
  D   0.0244  V 0.3354
  D   0.0172  V 0.3403
  D   0.0122  V 0.3468
  D   0.0086  V 0.3536
  D   0.0061  V 0.3620
  D   0.0043  V 0.3680
  D   0.0030  V 0.3763
```

On reconnaît le fichier *hgtc* donné § 2.2, preuve que XDQ l'a bien lu. Maintenant, il va mettre la caractéristique d'injection sous la forme qui lui convient :

```
Caractéristique d'injection mise en forme :
D 786.432  Vol o/o   0.0  k  0 *
D 393.216  Vol o/o   0.4  k  1 *
D 196.608  Vol o/o   2.6  k  2 **
D  98.304  Vol o/o   3.4  k  3 **
D  49.152  Vol o/o   3.8  k  4 **
D  24.576  Vol o/o   4.1  k  5 ***
D  12.288  Vol o/o   4.4  k  6 ***
D   6.144  Vol o/o   4.6  k  7 ***
D   3.072  Vol o/o   4.7  k  8 ***
D   1.536  Vol o/o   4.8  k  9 ***
D   0.768  Vol o/o  22.0  k 10 ***********
D   0.384  Vol o/o  74.4  k 11 ************************************
D   0.192  Vol o/o  82.4  k 12 ****************************************
D   0.096  Vol o/o  85.2  k 13 *****************************************
D   0.048  Vol o/o  87.0  k 14 ******************************************
D   0.024  Vol o/o  89.2  k 15 *******************************************
D   0.012  Vol o/o  92.3  k 16 *********************************************
D   0.006  Vol o/o  96.3  k 17 ***********************************************
D   0.003  Vol o/o 100.0  k 18 ************************************************
```

Le dernier diamètre D_n est resté tel quel, tous les autres sont recalculés par multiplications par 2 successives. Le premier diamètre (D_0) est donc plus grand que le plus grand diamètre du fichier original. n=18 ***classes de pores*** ont été ainsi définies. Pour que la caractéristique d'injection schématisée par des barres d'******** apparaisse correctement, il peut être nécessaire d'élargir la fenêtre d'exécution.

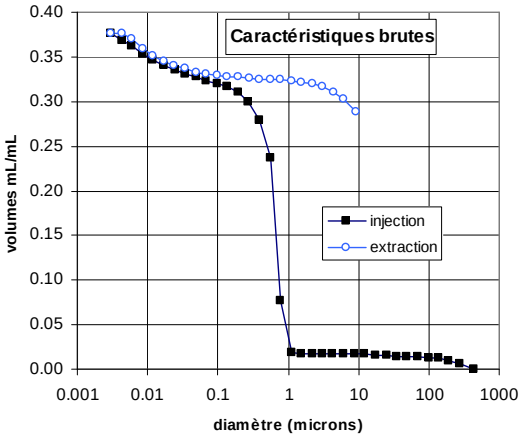


Fig. 2 Caractéristiques de la Terre cuite

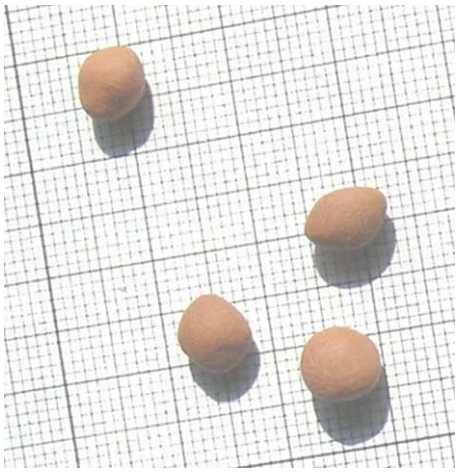


Fig.3 Les billes de Terre cuite.

```
Choisissez les limites de troncature
(kmin  kmax)
5 7

Choisissez vos tolérances sur le stade de percolation
(kmin  kmax)
10 11
```

L'utilisateur a choisi les limites de ***troncature*** de façon à éliminer la partie de la courbe dont la concavité semble tournée vers la gauche sur les barres d'*, soupçonnée de correspondre à la rugosité de l'échantillon. Pour faire ce choix, il est préférable d'avoir sous les yeux la caractéristique originale (Fig. 2), la concavité n'est pas toujours lisible sur les barres d'*****. La réponse de l'utilisateur signifie que les points de troncature k=5, 6, 7 seront tous trois essayés.

Si on désire fixer une seule troncature, on peut donner deux fois la même valeur, `6 6` par exemple.

Le choix des limites imposées au ***seuil de percolation*** (voir ***§ 1.3.2 et 1.5.2***) n'est pas capital. Cette disposition sert surtout à éviter d'encombrer les fichiers de résultats avec des reconstitutions aberrantes. Si le seuil est incertain sur la caractéristique, on peut sans inconvénient répondre par un large intervalle de valeurs de *k*. Ici, l'utilisateur a exigé à juste titre un intervalle étroit car dans le cas présent, il n'y a pas de doute sur le seuil.

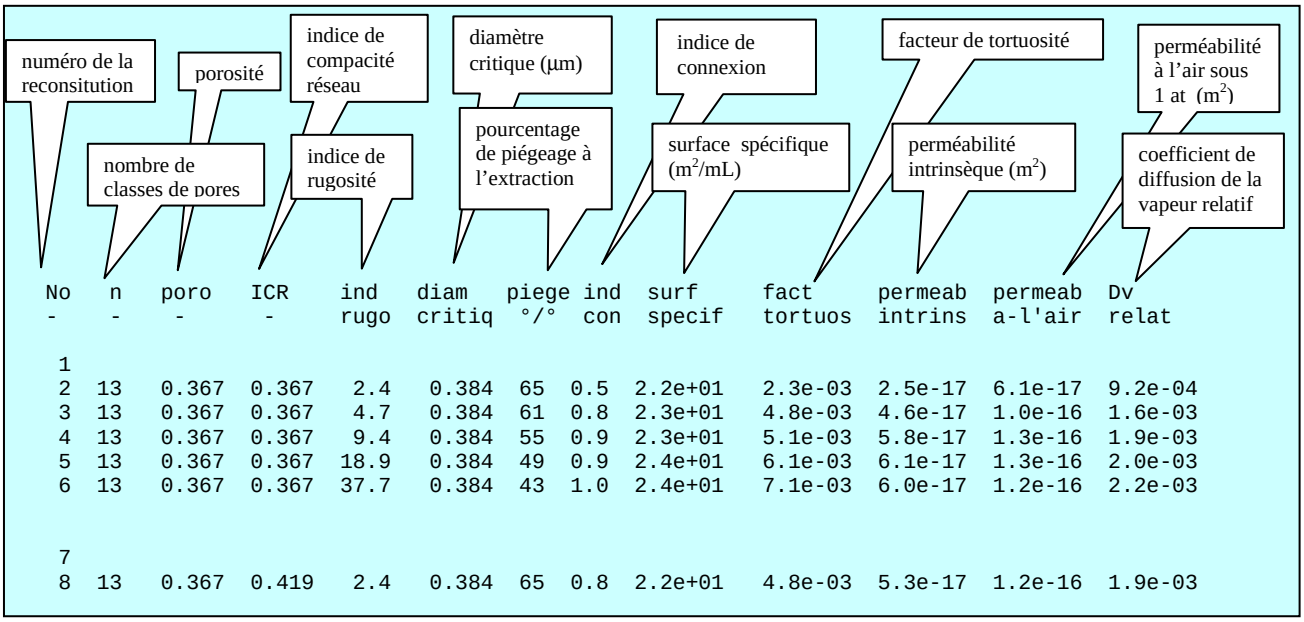
```
Entrer la taille en mm de l'échantillon
8
taille recalculée: 6.786279

Entrer la fraction minimum estimée de matière non poreuse
inférieure à 0.623700
0
```

Nous sommes dans le cas d'un échantillon qui se présente sous la forme de granulés. Plusieurs billes comme celles qu'on voit Fig. 3 ont été introduites dans le pénétromètre. La ***taille*** à indiquer est celle des granulés. Il y a évidemment une difficulté lorsque les grains sont de tailles très inégales. Il est préférable d'éviter ce type d'échantillons. Par ailleurs, le logiciel ne peut pas prendre en compte la taille exacte indiquée par l'utilisateur (voir ***§ 2.2.2***), et recalcule une taille proche de celle-ci. En ce qui concerne la ***fraction de matière non poreuse***, la nature du matériau ne permet pas d'en préjuger a priori ni d'en fixer le minimum, d'où la réponse « 0 ». L'interrogatoire est maintenant terminé, il reste à l'utilisateur à regarder s'afficher un à un les résultats du calcul.

```
* No * n * poro  * ICR * ind rugos * diam crit * piegé o/o * fac tort * perm int *


   1
   2  13   0.367  0.367     2.4        0.384         65      2.3e-03     2.5e-17
   3  13   0.367  0.367     4.7        0.384         61      4.8e-03     4.6e-17
   4  13   0.367  0.367     9.4        0.384         55      5.1e-03     5.8e-17
   5  13   0.367  0.367    18.9        0.384         49      6.1e-03     6.1e-17
   6  13   0.367  0.367    37.7        0.384         43      7.1e-03     6.0e-17

   7
   8  13   0.367  0.419     2.4        0.384         65      4.8e-03     5.3e-17
   9  13   0.367  0.419     4.7        0.384         59      6.4e-03     5.9e-17
  10  13   0.367  0.419     9.4        0.384         53      8.6e-03     7.1e-17
  11  13   0.367  0.419    18.9        0.384         48      9.1e-03     7.9e-17
  12  13   0.367  0.419    37.7        0.384         42      9.0e-03     8.9e-17

(......)

 103  11   0.365  0.990     1.2        0.768         32      3.3e-01     2.3e-15
 104  11   0.365  0.990     2.4        0.768         29      3.3e-01     1.8e-15
 105  11   0.365  0.990     4.7        0.768         26      3.3e-01     1.5e-15
 106  11   0.365  0.990     9.4        0.768         23      3.3e-01     1.3e-15
 107  11   0.365  0.990    18.9        0.768         20      3.3e-01     1.2e-15
 108  11   0.365  0.990    37.7        0.768         16      3.3e-01     1.2e-15

entrer un caractère pour finir
```

3 LES RESULTATS

3.1 LE FICHIER DES RESULTATS RESUMES



No	n	poro	ICR	ind rugo	diam critiq	piege °/°	ind con	surf specif	fact tortuos	permeab intrins	permeab a-l'air	Dv relat
-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
1												
2	13	0.367	0.367	2.4	0.384	65	0.5	2.2e+01	2.3e-03	2.5e-17	6.1e-17	9.2e-04
3	13	0.367	0.367	4.7	0.384	61	0.8	2.3e+01	4.8e-03	4.6e-17	1.0e-16	1.6e-03
4	13	0.367	0.367	9.4	0.384	55	0.9	2.3e+01	5.1e-03	5.8e-17	1.3e-16	1.9e-03
5	13	0.367	0.367	18.9	0.384	49	0.9	2.4e+01	6.1e-03	6.1e-17	1.3e-16	2.0e-03
6	13	0.367	0.367	37.7	0.384	43	1.0	2.4e+01	7.1e-03	6.0e-17	1.2e-16	2.2e-03
7												
8	13	0.367	0.419	2.4	0.384	65	0.8	2.2e+01	4.8e-03	5.3e-17	1.2e-16	1.9e-03

*Tab. 4 La liste des reconstitutions dans le fichier des résultats résumés (voir l'intégralité dans la **Fiche N°1 du Catalogue**)*

Le ***fichier des résultats résumés***, dénommé ici par l'utilisateur *hgtc+* reproduit tous les affichages apparus à la fenêtre au cours de l'exécution et rappelle notamment toutes les données fournies par l'utilisateur. La liste des reconstitutions effectuées (Tab. 4, voir la liste intégrale dans la ***Fiche N°1 du Catalogue***) qui occupe la seconde partie de ce fichier peut être ouverte avec un tableur.

Le numéro de reconstitution donné en première colonne permet de trouver la reconstitution considérée dans le fichier des résultats détaillés (*hgtc++*). En principe, il y a 36 reconstitutions par niveau de troncature demandé par l'utilisateur, soit ici 108 reconstitutions. Certaines cependant peuvent manquer comme dans l'exemple présent les N° 1 et 7 et quelques autres dans la suite du fichier (voir ***Fiche N°1 du Catalogue***). Cela se produit quand les limitations demandées par l'utilisateur ou des limitations prévues par le code ne sont pas satisfaites.

Dans les six colonnes suivantes, on trouve des paramètres qui ont été définis auparavant. Indications complémentaires :

- Le nombre de classes et la porosité dépendent de la troncature et restent constants dans les blocs de 36 reconstitutions consécutives.
- Le ***diamètre critique*** indique le premier stade de l'invasion à coeur. Plus exactement, la percolation a lieu dans l'intervalle qui précède, entre $2D_c$ et D_c.
- Le pourcentage de mercure piégé à l'issue d'une hypothétique extraction complète est le résultat d'une « simulation » XDQ qui peut dans certains cas servir de critère de choix entre les reconstitutions (voir ci après § 4.5)

- L'***indice de connexion*** est un indicateur dont la signification est explicitée aux ***§ 4.2.1*** et ***6.2.5*** du document complet. Voir ci dessous (§ 4.5) son utilisation comme critère de choix entre les reconstitutions.

- La ***surface spécifique*** est donnée en m^2 par mL de matériau.

Les quatre dernières colonnes contiennent l'évaluation XDQ de certains coefficients de transport équivalents de l'espace poreux totalement rempli d'un fluide (matériau « saturé », par opposition à l'occupation diphasique considérée au § 3.3 ci dessous).

- Le ***facteur de tortuosité*** τ (***§ 5.1.1***) est caractéristique de la morphologie de l'espace poreux et donne accès, joint à la porosité ε, à la ***conductivité équivalente*** de l'espace poreux saturé du fluide de conductivité σ_0 :

$$\sigma = \sigma_0 \varepsilon \tau \tag{4}$$

- La ***perméabilité intrinsèque*** en m^2 est le coefficient de transport relatif à l'écoulement visqueux lent dans l'espace poreux (loi de Darcy, ***§ 5.1.3***).

- La ***perméabilité à l'air*** est plus ou moins supérieure à la perméabilité intrinsèque en raison de l'effet Knudsen-Klinkenberg qui affecte l'écoulement des gaz (***§ 5.1.4***).

- Le ***coefficient de diffusion relatif de la vapeur d'eau*** est analogue à la conductivité relative $\sigma / \sigma_0 = \varepsilon \tau$ mais le facteur de tortuosité est réduit du fait de l'effet Knudsen qui affecte la diffusion dans les gaz (***§ 5.1.2***).

3.2 RESULTATS DETAILLES : LES RECONSTITUTIONS

3.2.1 Le fichier

Le ***fichier des résultats détaillés*** dénommé ici par l'utilisateur *hgtc++*, conçu pour être ouvert sous tableur, se présente sous forme de blocs contenant le détail de chacune des reconstitutions listées dans le fichier des résultats résumés. On y trouve ici un peu moins de $3 \times 36 = 108$ blocs, compte tenu des quelques reconstitutions invalidées.

L'un de ces blocs est reproduit Tab. 5. On retrouve dans les deux premières lignes le rappel des caractéristiques de la reconstitution considérée, ici la reconstitution N°104. Suit un premier tableau dont les colonnes ont les significations suivantes :

- *k* indice de classe de pores (sauf la première ligne *k*=0) ou étape de l'injection

- D_k diamètre de pores correspondant à l'étape *k* de l'injection (voir § 1.2 ci dessus). La classe *k*, dont les pores ont pour diamètre $d_k = \sqrt{D_k D_{k-1}}$ se remplit de mercure au cours du pas de pression correspondant à l'intervalle $[D_{k-1}, D_k]$

- *V-inj* volume de mercure $V_{\text{inj } k}$ injecté à l'étape *k* en mL/mL (caractéristique d'injection expérimentale recalculée compte tenu de la troncature)

- *V-cum* volume cumulé des pores de diamètre supérieur à D_k (ou ***distribution volumique cumulative des diamètres de pores***)

- *V-ext* volume de mercure restant dans l'échantillon au cours de l'extraction au niveau de pression défini par D_k (***caractéristique d'extraction simulée***). Cette colonne se lit de bas en haut. A la ligne 0 on trouve le volume définitivement piégé.

- *sat-M* signifie : degré de saturation en phase mouillante (voir ***§ 5.1.5*** et ***5.2.2*** et ci-après 3.3.1).

- Les trois dernières colonnes se réfèrent aux procédés de calcul fondés sur la Théorie de la percolation mis en oeuvre dans le code (voir ***§ 6.2.3***).

N°_104	n	ICR	Ind-rugos	diam-crit	piege(o/o)	pi1n	Surf(m2/mL)	
_	11	0.99	2.4	0.768	29	1	2.61E+01	
k	Dk(microns)	V-inj	V-cum	V-ext	sat-M	pk	pi1k	ro1k
0	6.144	0	0	0.1071	1	0	0	1
1	3.072	0.0004	0.0517	0.1075	0.8585	0.1401	0.1401	0.8599
2	1.536	0.0006	0.0748	0.1076	0.7952	0.0729	0.1491	0.8598
3	0.768	0.0666	0.1309	0.1371	0.6417	0.1906	0.2568	0.8598
4	0.384	0.2673	0.2674	0.2736	0.2679	0.5735	1	0.8575
5	0.192	0.2978	0.3002	0.304	0.1779	0.3236	1	0.8558
6	0.096	0.3086	0.3094	0.3136	0.1528	0.1337	1	0.8557
7	0.048	0.3153	0.3152	0.3198	0.1368	0.0981	1	0.8557
8	0.024	0.3238	0.3287	0.3288	0.1	0.2505	1	0.8557
9	0.012	0.3356	0.3363	0.3363	0.0793	0.1882	1	0.8557
10	0.006	0.351	0.3511	0.3511	0.0388	0.4536	1	0.8557
11	0.003	0.3652	0.3652	0.3652	0	0.7932	1	0
sat-M	cond-M	cond-NM	Kl-M(m2)	Kl-NM(m2)	Kg1at(m2)	HR	Dv-relat	Kl-eq(m2)
1	1.21E-01	0.00E+00	1.92E-15	0.00E+00	0.00E+00	1	3.97E+05	1.88E-15
0.8585	9.48E-02	0.00E+00	7.89E-16	0.00E+00	0.00E+00	0.999	1.60E+05	7.57E-16
0.7952	8.51E-02	0.00E+00	5.50E-16	0.00E+00	0.00E+00	0.999	1.10E+05	5.22E-16
0.6417	5.79E-02	1.69E-05	2.16E-16	9.27E-19	1.75E-18	0.997	4.73E+04	2.23E-16
0.2679	7.33E-03	6.79E-02	5.86E-19	1.75E-15	3.81E-15	0.995	1.15E+02	5.41E-19
0.1779	3.46E-03	7.85E-02	3.79E-20	1.92E-15	4.28E-15	0.989	1.05E+01	4.90E-20
0.1528	2.57E-03	8.00E-02	1.81E-20	1.73E-15	4.13E-15	0.979	4.29E+00	1.99E-20
0.1368	2.01E-03	8.07E-02	1.05E-20	1.85E-15	4.17E-15	0.959	2.83E+00	1.28E-20
0.1	1.23E-03	8.66E-02	2.45E-21	1.80E-15	4.05E-15	0.919	8.37E-01	3.64E-21
0.0793	8.50E-04	9.13E-02	1.05E-21	1.79E-15	4.45E-15	0.844	5.19E-01	2.07E-21
0.0388	2.18E-04	1.10E-01	1.18E-22	1.81E-15	4.36E-15	0.713	2.11E-01	7.13E-22
0	0.00E+00	1.21E-01	0.00E+00	1.93E-15	4.24E-15	0.508	8.52E-02	2.05E-22

Tab. 5 Un bloc du fichier des résultats détaillé. Reconstitution N° 104.

Le second tableau du bloc, consacré aux coefficients de transport diphasiques, est expliqué ci après § 3.3.1.

3.2.2 Distribution des tailles de pores, extraction simulée

La figure 6 donne la représentation graphique des données du premier tableau relatif à la reconstitution N° 104 (Tab. 5) et en regard les caractéristiques d'injection et d'extraction expérimentales de la Terre cuite. Cette reconstitution correspond à une troncature à 11 classes de pores (soit 12 points sur chaque courbe).

- La caractéristique d'injection (colonne *V-inj* du tableau 5) reproduit exactement la caractéristique expérimentale, après interpolation selon les 12 diamètres D_k formant une suite géométrique de raison 2, troncature et correction de porosité.

- La distribution volumique cumulative des tailles de pores (colonne *V-cum* du tableau 5) a été obtenue par la procédure de reconstitution XDQ. Elle s'écarte sensiblement de la caractéristique d'injection dans la région qui précède le diamètre critique (0.77 µm selon le calcul XDQ, voir en tête du Tab. 5) et coïncide pratiquement avec celle-ci au delà de 0.4 µm. Cette coïncidence en fin d'injection n'est aucunement un caractère général des reconstitutions XDQ, c'est une particularité de ce matériau.

- Dans le cas particulier de ce matériau, le début de la caractéristique d'extraction simulée coïncide pratiquement avec la fin d'injection et la queue de distribution. Au delà, la courbe présente rapidement un plateau correspondant au piégeage définitif de 30% du mercure injecté. Cette simulation de l'extraction ne peut être directement comparée à la courbe expérimentale, laquelle est affectée par le retard à la cavitation du mercure, et de plus, est interrompue au niveau du diamètre 10 µm correspondant à la pression atmosphérique. On peut néanmoins observer que, comme la caractéristique simulée, elle coïncide en début d'extraction avec la caractéristique d'injection. On peut d'autre part deviner peu avant l'interruption des 10 µm l'amorce assez nette d'une extraction significative, compatible, compte tenu du retard à la cavitation, avec la simulation XDQ et le taux de piégeage définitif correspondant de 30%.

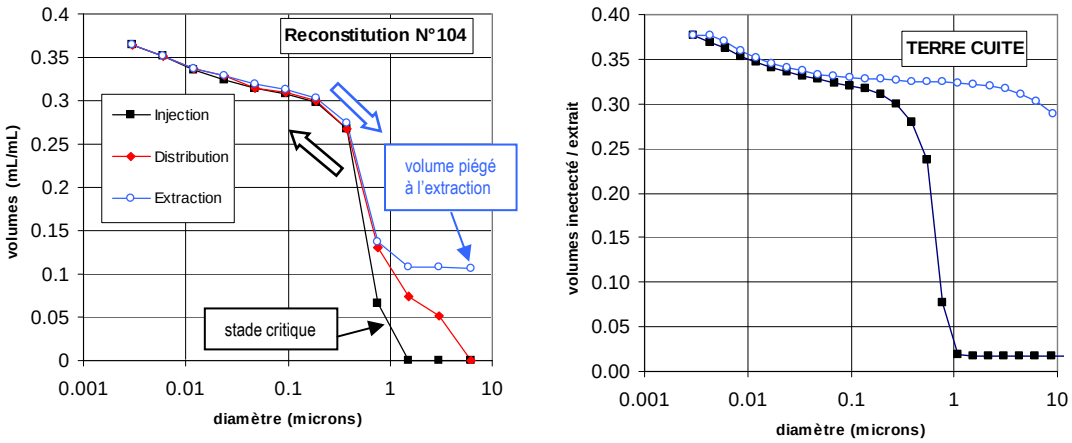


Fig. 6 La reconstitution N° 104 de la Terre cuite, comparée aux caractéristiques expérimentales

3.3 ESTIMATION XDQ DES COEFFICIENTS DE TRANSPORT DIPHASIQUES

3.3.1 Le tableau

On traite ici de l'espace poreux partagé entre un fluide ***non mouillant*** logé dans les pores de plus grande taille et un fluide ***mouillant*** qui occupe les plus fins. Pour illustrer ce paragraphe, nous choisissons la reconstitution N° 98 de la Terre cuite (Tab. 7, ***Fiche N°1 du Catalogue***) au lieu de la N° 104 précédemment analysée. On notera qu'elle est obtenue pour un réseau de compacité inférieure au maximum permis, c'est à dire incomplètement occupé, ce qui la rend plus démonstrative pour certains aspects. La nomenclature de la première partie du tableau a déjà été expliquée, précisons celle de la seconde.

N°_98	n	ICR	Ind-rugos	diam-crit	piege(o/o)	pi1n	Surf(m2/mL)	
	11	0.738	2.4	0.768	42	1	2.61E+01	
k	**Dk(microns)**	**V-inj**	**V-cum**	**V-ext**	**sat-M**	**pk**	**pi1k**	**ro1k**
0	6.144	0	0	0.1526	1	0	0	1
1	3.072	0.0004	0.0613	0.153	0.8322	0.1238	0.1238	0.8762
2	1.536	0.0006	0.0911	0.1531	0.7507	0.0686	0.1316	0.8757
3	0.768	0.0666	0.1706	0.1845	0.5328	0.1969	0.253	0.8095
4	0.384	0.2673	0.2711	0.2813	0.2576	0.3224	0.9996	0
5	0.192	0.2978	0.2989	0.3085	0.1815	0.1218	1	0
6	0.096	0.3086	0.3098	0.3185	0.1518	0.061	1	0
7	0.048	0.3153	0.3176	0.3249	0.1304	0.0512	1	0
8	0.024	0.3238	0.3281	0.3327	0.1018	0.0706	1	0
9	0.012	0.3356	0.3411	0.3428	0.0661	0.0894	1	0
10	0.006	0.351	0.3548	0.3548	0.0286	0.0986	1	0
11	0.003	0.3652	0.3652	0.3652	0	0.0878	1	0
sat-M	**cond-M**	**cond-NM**	**Kl-M(m2)**	**Kl-NM(m2)**	**Kg1at(m2)**	**HR**	**Dv-relat**	**Kl-eq(m2)**
1	3.72E-02	0.00E+00	8.53E-16	0.00E+00	0.00E+00	1	1.75E+05	8.29E-16
0.8322	2.34E-02	0.00E+00	3.70E-16	0.00E+00	0.00E+00	0.999	7.36E+04	3.48E-16
0.7507	1.75E-02	0.00E+00	2.13E-16	0.00E+00	0.00E+00	0.999	4.72E+04	2.23E-16
0.5328	3.24E-03	5.42E-06	2.68E-17	2.27E-19	3.56E-19	0.997	5.74E+03	2.71E-17
0.2576	0.00E+00	3.46E-02	0.00E+00	7.74E-16	1.76E-15	0.995	3.63E-02	1.71E-22
0.1815	0.00E+00	3.70E-02	0.00E+00	8.14E-16	1.80E-15	0.989	3.12E-02	1.46E-22
0.1518	0.00E+00	3.68E-02	0.00E+00	7.75E-16	1.85E-15	0.979	2.96E-02	1.37E-22
0.1304	0.00E+00	3.79E-02	0.00E+00	7.47E-16	1.78E-15	0.959	3.06E-02	1.39E-22
0.1018	0.00E+00	3.82E-02	0.00E+00	8.42E-16	1.77E-15	0.919	3.10E-02	1.35E-22
0.0661	0.00E+00	3.79E-02	0.00E+00	8.47E-16	1.90E-15	0.844	2.99E-02	1.19E-22
0.0286	0.00E+00	3.77E-02	0.00E+00	8.74E-16	1.85E-15	0.713	3.01E-02	1.02E-22
0	0.00E+00	3.76E-02	0.00E+00	8.41E-16	1.96E-15	0.508	3.06E-02	7.35E-23

*Tab. 7 Extrait du fichier des résultats détaillés pour la Terre cuite (**Fiche N°1 du Catalogue**). Reconstitution N°98.*

- *sat-M* ***taux de saturation*** en phase mouillante. Fraction de la porosité occupée par la phase mouillante (voir commentaires ***§ 5.1.5***). Ces états de saturation correspondent au remplissage par le fluide non mouillant des classes successives de pores indicées *k* dans le premier tableau.

- *cond-M* ***conductivité relative*** σ / σ_0 pour la phase ***mouillante*** dans cet état de saturation

- *cond-NM* ***conductivité relative*** σ / σ_0 pour la phase ***non mouillante*** dans cet état de saturation

- *Kl-M* ***perméabilité au liquide mouillant*** dans cet état de saturation, en m^2

- *Kl-NM* ***perméabilité au liquide non mouillant*** dans cet état de saturation, en m^2

- *Kg1at* ***perméabilité à l'air*** (non mouillant) sous 1 atmosphère dans cet état de saturation, en m^2

- *HR* ***humidité relative*** de l'air calculée selon les relations de Laplace (relation (1) ci dessus) et Kelvin (voir ***§ 5.11***).

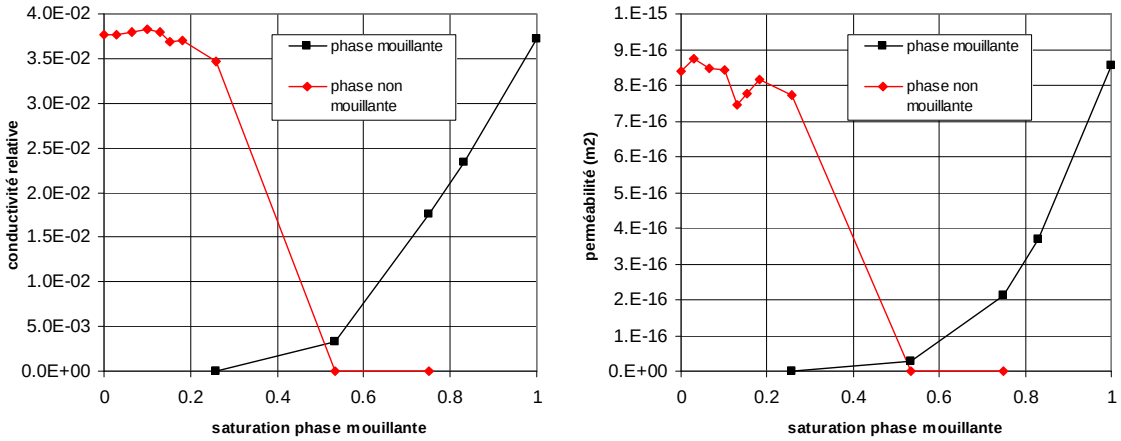
- *Dv-relat* rapport entre le ***coefficient de diffusion de la vapeur d'eau*** équivalent dans le milieu D_{veq} (voir ***§ 5.1.6***) et le coefficient de diffusion dans l'air libre D_0, dans les conditions normales.

- *Kl-eq* perméabilité au liquide équivalente, en m^2, (***§ 5.1.6***). Ces deux derniers coefficients sont tous deux représentatifs du transport global et interactif d'humidité dans les deux phases (voir ci après 3.3.4).

3.3.2 Les saturations résiduelles

Pour chacune des deux phases, la saturation résiduelle est celle pour laquelle la continuité de la phase est rompue. Ces deux saturations apparaissent en plusieurs endroits dans le tableau 6. Dans la première partie du tableau, les colonnes « pi1k » et « ro1k » sont des indicateurs du degré de connexion des phases non mouillante et mouillante respectivement (***§ 6.2.4*** et ***6.2.6***). La phase considérée est connectée si cet indicateur est supérieur au seuil critique de la Théorie de la percolation, 0.25 (***§ 6.1.3***). On observe notamment dans la première partie du tableau que la phase non mouillante accède à la connexion à l'étape $k = 3$, le diamètre de pore correspondant D_k étant le diamètre critique de l'injection du mercure rappelé en tête du tableau. La connexion de la phase mouillante est rompue quant à elle dès l'étape 4. La rupture de continuité des phases se repère dans la seconde partie du tableau par l'annulation des coefficients de transport pour chacune des phases, conductivité et perméabilité (Tab 6 et Fig. 7). Les coefficients D_{veq} et k_{eq} ne s'annulent pas aux saturations résiduelles car ils concernent le transport d'humidité couplé dans les deux phases.

3.3.3 Conductivité et perméabilité.



a Conductivité relative *b Perméabilité*

Fig. 8 Coefficients de transport diphasique évalués par XDQ

Les fluctuations et des défauts de monotonie des coefficients de transport évalués ne sont pas significatives. Elles sont dues à l'imprécision du mode de calcul XDQ (***§ 6.3.2***).

On retrouve dans chaque bloc du fichier des résultats détaillés (Tab. 7), à la saturation pour chacune des phases, la conductivité relative et la perméabilité intrinsèque qui figuraient dans le fichier des résultats résumés (Tab. 4 et ***Fiche N°1 du Catalogue***) sous le numéro de reconstitution correspondant. Avec là encore de légères différences dues au mode de calcul XDQ.

Le comportement des coefficients de transport évalués par la méthode XDQ avec le degré de saturation (Fig. 8) est globalement conforme à ce qu'on trouve dans la littérature. Certaines

particularités de ce comportement pour le matériau pris pour exemple s'expliquent de façon cohérente par la structure poreuse mise en évidence par la reconstitution XDQ (***§ 5.2***).

3.3.4 Transport couplé d'humidité

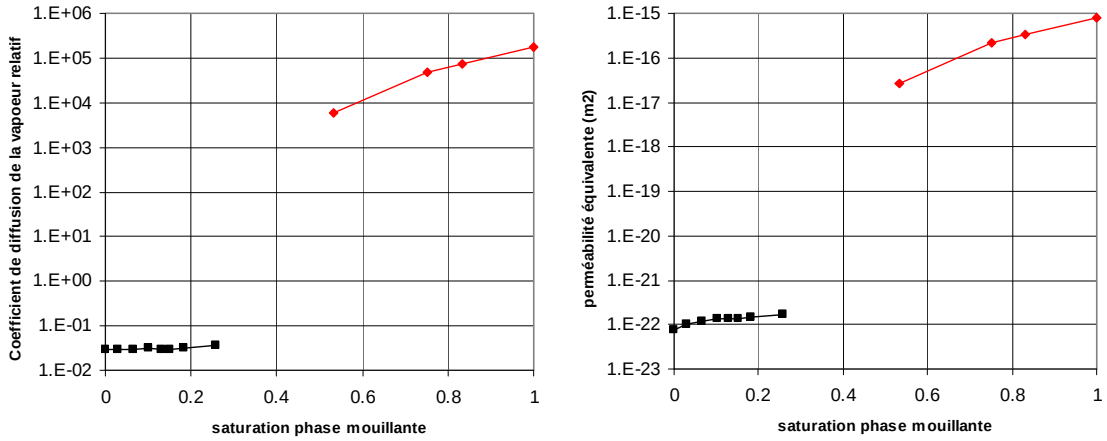


Fig.9 Transport d'humidité : coefficient de diffusion équivalent relatif D_{veq} / D_0 *et perméabilité équivalente* k_{eq}

Les deux formes du coefficient de transport équivalent (voir ***§ 5.1.6***), D_{veq} et k_{eq}, sont présentées Fig. 9. Le saut brutal du coefficient lorsque la phase liquide se connecte résulte de la structure poreuse particulière de ce matériau (***§ 5.2.5***). Dans le domaine où la phase liquide n'est pas continue, la diffusion de vapeur contrôle le transport d'humidité. Le coefficient de diffusion relatif reste pratiquement constant, fluctuant autour de 0.03. Il n'est que légèrement inférieur à la conductivité relative, qui est d'environ 0.038, ce qui montre que l'effet Knudsen, principal cause de différence entre ces deux coefficients, a peu d'influence dans le cas de ce matériau. Lorsque la phase liquide accède à la continuité, c'est le coefficient k_{eq} qui devient significatif, il se confond en pratique avec la perméabilité au liquide, aux erreurs XDQ près.

3.3.5 La perméabilité aux gaz

Voici les données supplémentaires à indiquer lors de l'exécution du code ***xdqkg.exe*** :

```
Température Kelvin, Masse molaire du gaz (g/mole), Viscosité (microPascal.seconde)
Exemple pour l'air à 20°C
293.  29.  18.2
293 29 18.2

Entrez 5 pressions en bar pour le calcul de la perméabilité au gaz
(P1  P2  P3  P4  P5)
.2 .3 .5 1 5
```

Dans le fichier des résultats détaillés, on retrouve pour chaque reconstitution valide le premier tableau relatif à la structure poreuse (Tab. 7 ci dessus). Le second tableau reproduit ci dessous (Tab. 10, reconstitution N° 98 de la Terre cuite) donne, en fonction de la saturation, la perméabilité au gaz pour les 5 pressions commandées par l'utilisateur et la perméabilité au liquide.

Pression(bar):	0.2	0.3	0.5	1	5	
sat-M	Kg(P1)(m2)	Kg(P2)(m2)	Kg(P3)(m2)	Kg(P4)(m2)	Kg(P5)(m2)	Kliq(m2)
1	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	8.13E-16
0.8322	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	3.63E-16
0.7507	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	2.31E-16
0.5328	1.24E-18	8.06E-19	5.35E-19	4.46E-19	2.97E-19	2.51E-17
0.2576	5.38E-15	3.90E-15	2.62E-15	1.72E-15	1.04E-15	0.00E+00
0.1815	6.01E-15	4.55E-15	2.82E-15	1.80E-15	1.10E-15	0.00E+00
0.1518	5.93E-15	3.95E-15	2.64E-15	1.79E-15	1.01E-15	0.00E+00
0.1304	5.82E-15	4.19E-15	3.15E-15	1.95E-15	1.09E-15	0.00E+00
0.1018	5.64E-15	4.48E-15	2.82E-15	1.81E-15	9.91E-16	0.00E+00
0.0661	5.56E-15	4.16E-15	2.72E-15	1.97E-15	9.47E-16	0.00E+00
0.0286	5.78E-15	4.02E-15	2.73E-15	1.95E-15	1.13E-15	0.00E+00
0	6.03E-15	4.28E-15	3.05E-15	1.77E-15	1.04E-15	0.00E+00

Tab. 10 La perméabilité aux gaz dans le fichier des résultats détaillés de ***xdqkg***

La Fig. 11 montre l'évolution de l'estimation XDQ de la perméabilité à l'air à saturation dans la présentation de Klinkenberg. Cet auteur suggère que la perméabilité du poreux saturé de gaz varie avec la pression de la façon suivante :

$$k_g = k + \frac{\beta}{P} \tag{5}$$

où k est la perméabilité intrinsèque. Selon XDQ, ce comportement, quoi que semi empirique, est très bien vérifié pour ce matériau. Aux fortes pressions, la perméabilité au gaz tend effectivement vers la perméabilité intrinsèque.

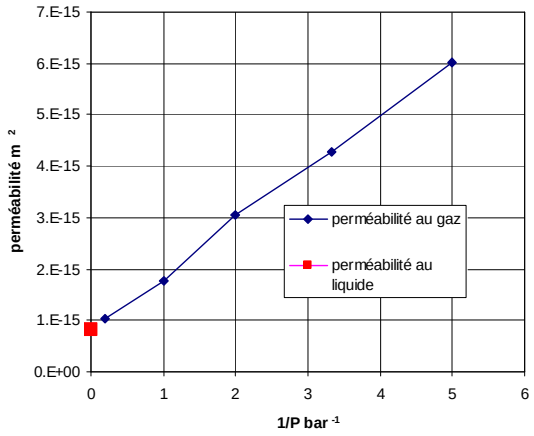


Fig.11 La perméabilité à l'air en fonction de l'inverse de la pression

4 CHOISIR ENTRE LES RECONSTITUTIONS

4.1 L'EMBARRAS DU CHOIX

Interpréter le message sibyllin délivré par la porométrie au mercure n'est pas une sine cure. Chaque matériau, voire chaque échantillon, est un cas particulier qui exige une réflexion

minutieuse et spécifique. XDQ est censé aider l'utilisateur dans ce travail, mais hélas, loin de lui simplifier la tâche, il la lui complique substantiellement en proposant non pas une mais un nombre respectable de reconstitutions de l'espace poreux, auxquelles sont associées autant d'estimations fort différentes des coefficients de transport. On devine qu'il n'y a pas de recette miracle pour choisir entre toutes ces propositions. Les recommandations formulées dans le document complet *Porométrie au mercure. Le Modèle XDQ* peuvent difficilement se résumer et sont donc reproduites quasi intégralement dans la présente notice abrégée, y compris les références aux analyses proposées dans le ***Catalogue de matériaux poreux***. La consultation de ce catalogue est encore la meilleure façon d'appréhender les problèmes liés à l'interprétation de la porométrie au mercure, avec ou sans l'outil XDQ.

4.2 LE NIVEAU DE TRONCATURE

En ce qui concerne le niveau de troncature de la caractéristique d'injection à retenir, le critère du sens de la concavité de la courbe (***§ 1.5.3***), lorsqu'il est lisible, est souvent efficace, au moins pour donner la troncature minimale à adopter lors de l'exécution. Si, au delà de la région de la courbe dont la concavité est tournée vers le bas, la pente est appréciable, il n'y a pas de raison de tronquer plus sévèrement. On entre probablement alors dans la région de l'injection précritique.

Dans le cas contraire, il est difficile de choisir, comme par exemple dans le cas de l'Argilite (Fig. 1 ci dessus, ***Fiche N° 8 du Catalogue***) où même aucune région à concavité vers les bas n'est visible). Il est recommandé alors de commander lors de l'exécution tous les niveaux de troncature qui précèdent l'apparition d'une pente significative de la caractéristique, ce qui naturellement ne fait que retarder le moment du choix après l'exécution. Il sera alors peut-être possible de se faire une idée de la pertinence de chacun des niveaux de troncature essayés d'après la forme de la distribution des tailles de pores reconstituée. Il arrive souvent en effet qu'une troncature inadéquate fasse apparaître une rupture de pente dans la distribution des tailles de pores qui n'a pas lieu d'être a priori (voir par exemple ***Fiche N° 1***, reconstitution 31; ***Fiche N° 8***, reconstitution 141 ; ***Fiche N° 9***, reconstitution 17).

Méfions nous cependant des pièges de la concavité : prenons l'exemple de la Terre de construction (***Fiche N° 4***). La courbe présente une région à concavité vers le bas au beau milieu du domaine. Faut-il tronquer jusqu'à l'éliminer ? Certainement pas, en tout cas pas a priori. Cette forme de caractéristique révèle vraisemblablement une distribution bimodale des tailles de pores. Il faut s'attendre à ce que de la série des reconstitutions se dégagent plusieurs hypothèses concernant le rôle joué par les différentes classes de pores dans la connexion de l'espace poreux. C'est seulement après avoir analysé cette série qu'il faudra reconsidérer la nature de la première « bosse » de la caractéristique. Dans le cas présent, il est très peu probable qu'elle soit à exclure du domaine de la porosité.

4.3 L'INDICE DE RUGOSITE (*IR*)

L'état de surface de l'échantillon peut être apprécié visuellement et en tenant compte de la façon dont il a été obtenu. Pour les matériaux consolidés, les fragments obtenus en cassant un bloc ont une surface qui s'est formée par rupture naturelle. Les surfaces de ce type présentent assez souvent une forte rugosité et parfois une structure fractale génératrice de très fortes surfaces. Les reconstitutions dont l'indice de rugosité est supérieur à 2 pourront être privilégiées dans ce cas. L'aspect visuel de l'échantillon n'est pas toujours un indicateur suffisant de sa rugosité réelle, laquelle peut être de taille typique invisible à l'oeil nu tout en conférant à l'échantillon une importante surface extérieure. Il ne faut donc pas rejeter

systématiquement les reconstitutions à fort indice de rugosité, même si l'échantillon ne semble pas très rugueux. L'indice de rugosité, comme les autres paramètres d'ajustement, ne peut être valablement choisi indépendamment des autres et sans prendre en compte l'ensemble des critères.

4.4 L'INDICE DE COMPACITE DU RESEAU (*ICR*)

Ce paramètre est le plus difficile à apprécier directement car sa valeur reflète des caractères morphologiques de la structure poreuse qui sont le plus souvent inaccessibles à l'investigation quantitative (***§ 2.2.3***). On dispose toujours d'un minimum d'informations susceptibles d'orienter le choix de l'ICR. On sait par exemple que les empilements granulaires ont tendance à concentrer la porosité dans une fraction réduite de l'espace, générant ainsi des espaces poreux fortement connectés malgré une porosité modérée. La microscopie peut compléter ces informations et révéler des caractères remarquables de la forme des pores ou de leur arrangement spatial. Mais il est en général impossible de traduire quantitativement ces informations par une valeur du paramètre. Il faudra là encore choisir entre les hypothèses proposées par le logiciel en procédant par recoupement entre l'information directe disponible sur la morphologie du milieu et l'ensemble des indicateurs indirects de la vraisemblance des reconstitutions.

On notera en consultant le ***Catalogue*** qu'en règle générale, c'est l'indice de compacité maximal 0.99 qui donne lieu à une ou plusieurs reconstitutions satisfaisantes au regard des données disponibles sur le matériau. Deux exceptions remarquables cependant, celles des ***Fiches N° 6*** (Pâte de ciment haute performance) et ***8*** (Argilite). Il s'agit de deux matériaux très denses à très faible porosité, issus de processus industriels ou géologiques spéciaux. Dans de tels cas, un réseau à faible indice de compacité et faiblement connecté peut se révéler représentatif de la structure de l'espace poreux, du moins de la partie explorée par le mercure.

Le seul cas où une information quantitative sur la fraction non poreuse est accessible est celui des matériaux comportant par fabrication des inclusions non poreuses ou très peu poreuses en quantité connue, comme les mortiers et bétons. Toutefois, ceci ne donne accès qu'à une borne inférieure de la fraction non poreuse, à indiquer lors de l'exécution, sans permettre d'exclure les valeurs plus grandes représentatives de particularités morphologiques de la partie poreuse de la matière.

Dans le cas des matériaux de très faible porosité, (***Fiches N° 6*** et ***8***), rien ne nous permet d'indiquer a priori lors de l'exécution une valeur minimale de la fraction non poreuse. On répondra donc « zéro » à l'interrogation du code, tout en s'attendant à ce que XDQ ne trouve que très peu de reconstitutions acceptables. Les seules reconstitutions qui apparaîtront dans les résultats seront probablement celles qui correspondent à ICR=0.99, ce qui laissera peu de choix à l'utilisateur. Il est recommandé dans ce cas d'effectuer une nouvelle exécution en indiquant une fraction non poreuse minimale proche de la valeur à ne pas dépasser qui s'affiche à l'écran (voir ***Fiches N° 6 et 8***).

4.5 LES INDICATEURS INDIRECTS

- En théorie, le ***taux de piégeage*** à l'extraction du mercure calculé par le code est un excellent indicateur de la validité d'une reconstitution XDQ, car ce paramètre est fortement déterminé par l'arrangement de l'espace poreux et le rôle que jouent dans sa connexion les différentes classes de pores. Malheureusement, il est rare qu'on puisse l'utiliser directement. Le plus souvent, l'extraction réalisée expérimentalement est

incomplète, d'une part parce que l'extraction est limitée au niveau des 10 μm qui correspond à la pression atmosphérique, d'autre part en raison du retard à la cavitation du mercure.

- A défaut, la ***caractéristique d'extraction simulée*** dans son ensemble donnée dans le fichier des résultats détaillés peut apporter une précieuse indication. La caractéristique simulée doit se situer sous la caractéristique d'extraction expérimentale. En effet, celle ci est affectée en général par le retard à la cavitation, tandis que la simulation ignore ce phénomène et par conséquent tend à sous-estimer le volume piégé à chaque étape. Ce critère est à utiliser particulièrement quand la région initiale de la caractéristique d'extraction expérimentale est proche de la caractéristique d'injection. Ce caractère, qui apparaît pour la Terre cuite prise comme exemple ci dessus, est une importante indication sur la structure poreuse (***§ 4.2.3*** et ***Fiche N°1***).

- L'aspect de la ***distribution cumulative*** des tailles de pores peut en dernier ressort servir comme critère de choix entre les reconstitutions. Un choix inadéquat des paramètres d'ajustement, particulièrement du niveau de troncature et de l'indice de rugosité, génère souvent des irrégularités de forme, notamment des ruptures de pente. Les reconstitutions qui présentent ce type d'anomalies peuvent à bon droit être regardées de travers, à moins d'avoir de bonnes raisons de penser qu'elles sont représentatives d'une réalité.

- Les reconstitutions dont l'***indice de connexion*** n'apparaît pas comme égal à l'unité ou à la rigueur supérieur à 0.9 sont en général peu recommandables. Encore que cette règle puisse être transgressée dans certains cas particuliers (***Fiches N° 6*** et ***8***).

- Enfin, lorsqu'on dispose d'une mesure digne de confiance d'un ***coefficient de transport***, il est clair qu'elle doit être utilisée en priorité comme critère de choix entre les reconstitutions XDQ. En ayant soin toutefois de vérifier que l'injection du mercure et la mesure du coefficient de transport sont bien réalisées dans les mêmes conditions ambiantes, et qu'aucune des deux mesures n'engendre une modification de l'espace poreux (voir à ce sujet ***§ 1.1.2*** et ***Fiche N° 9***)

4.6 XDQ NE PEUT PAS TOUT FAIRE

On ne peut pas terminer cette notice sans mettre en garde l'utilisateur qui, se laissant emporter par l'enthousiasme, tenterait d'obtenir d'XDQ ce qu'il n'est pas conçu pour faire. La structure d'espace poreux sur laquelle est fondé le modèle, très fortement contrainte, ne se prête pas à la représentation de tous les poreux. On peut dès lors lister quelques cas dans lesquels XDQ est inadéquat, ou à employer avec précautions.

- XDQ est conçu pour traiter des distributions largement étalées. Les empilements de billes de taille uniforme, les sables à granulométrie étroite n'entrent pas dans cette catégorie, mais l'utilisation du code n'est cependant pas gravement aberrante (voir ***Fiche N° 11***).

- Les matériaux composites, les associations de poreux de différentes natures, les poreux à inclusions elles mêmes poreuses sont en principe à écarter, ne respectant pas la condition d'homogénéité impliquée dans le modèle. Deux cas particuliers cependant. 1- Les matériaux à inclusions non poreuses comme les ciments et mortiers. Encore faut-t-il se méfier de ce que les cimentiers appellent l'auréole de transition,

couche enrobant les granulats dont la porosité est altérée. 2- Le cas très spécial de l'association de deux poreux dont les deux distributions de taille sont parfaitement disjointes (voir ***Fiches N° 2*** et ***3*** du ***Catalogue***). Dans le cas où le support est de porosité grossière et les inclusions de porosité fine, le mercure pourra éventuellement envahir successivement chacun des deux poreux et la caractéristique d'injection sera alors tout simplement scindée en deux parties séparées par un plateau. En revanche, il n'en est pas ainsi dans le cas inverse où les inclusions sont constituées d'un poreux plus grossier que le milieu qui les contient.

- Les poreux fissurés, comme par exemple une argile ou un ciment qui a subi un endommagement par retrait au séchage, se prêtent mal au traitement XDQ. La fracturation n'est pas en soi un problème majeur. On peut traiter par XDQ les réseaux de fractures aléatoires dans un solide non poreux (***§ 2.2.3***). La morphologie particulière des fractures, qui se caractérise par la disproportion entre leur extension et leur ouverture peut être prise en compte en ajustant la compacité du réseau (ICR). En revanche, on ne peut valablement traiter de milieux dans lesquels coexistent un réseau de fractures et un espace poreux dont les pores ont un rapport de forme radicalement différent.

- L'utilisation d'XDQ est sujette à caution pour tous les espaces poreux générés par des processus fortement déterministes, laissant peu de place au hasard et au désordre, comme la propagation de fractures sous un champ de contrainte organisé ou certains phénomènes d'érosion ou de contamination. De tels milieux s'écartent du caractère désordonné et des conditions d'homogénéité et d'isotropie requises par le modèle. Il n'est pas exclu de tenter malgré cela la reconstitution, mais il faudra regarder les résultats d'un oeil particulièrement critique.

- La structure modèle XDQ n'est pas conçue pour traiter de matériaux comme le béton cellulaire, la pierre ponce, ou les ciments et bétons de qualité médiocre à fort taux d'air occlus. Les inclusions d'air sont des pores qui ont cette étrange propriété de ne jamais s'interconnecter quelle que soit leur concentration spatiale. XDQ ne veut pas connaître ce genre d'individus.

L'utilisateur qui, à ses risques et périls, se hasardera à transgresser les recommandations qui précèdent devra pour le moins multiplier les précautions critiques en interprétant les séries de reconstitutions XDQ. Il s'expose en outre à choir dans un abîme de perplexité s'il se met en tête de tricher avec le modèle pour tenter envers et contre tout de lui faire dire ce qu'il ne sait pas.